Парамагнетизм молекулы кислорода и трехэлектронная связь.

Безверхний Владимир Дмитриевич.

Украина, e-mail: bezvold@ukr.net

Молекула кислорода парамагнитна, и что важно, имеет кратность связи равную 2 (это экспериментальный факт, ИК-спектры).

Поэтому, адекватно изобразить формулу кислорода на классическом языке химии, то есть формулами Льюиса, невозможно. Но, распределение электронной плотности в молекуле должно быть стационарным и усредненным по времени, следовательно, строение молекулы кислорода все-таки можно передать формулой.

Необходимо осознать простой факт, что формулу кислорода невозможно записать, если не принять, что существует реальная трехэлектронная связь с нормальной кратностью, то есть 1,5.

Тогда, молекулу кислорода можно правильно изобразить с помощью двух трехэлектронных связей и двух неспаренных электронов на атомах кислорода. Но, согласно правилу октета, каждый атом кислорода должен иметь октет из 8 электронов. Следовательно, часть электронов связи не будет учитываться (не учитываем 1 электрон; или точнее, два полу-электрона), а это значит, что неспаренные электроны находящиеся на атомах кислорода активно взаимодействуют с электронами связи, что приводит к понижению кратности.

Только таким образом можно адекватно изобразить формулу молекулы кислорода, так как молекула парамагнитна и имеет кратность связи равную 2. Вот формула [1].

В конце отмечу, что теория молекулярных орбиталей, которая впервые адекватно объяснила парамагнетизм молекулы кислорода, находится в непреодолимом противоречии с принципом квантовой суперпозиции - принцип квантовой суперпозиции запрещает получать МО у которых энергетический уровень отличается от исходных АО.

Принцип квантовой суперпозиции [2]:

"...Пусть в состоянии с волновой функцией $\psi 1(q)$ некоторое измерение приводит с достоверностью к определенному результату - результат 1, а в состоянии $\psi 2(q)$ - к результату 2. Тогда принимается, что всякая функция вида $C1\psi 1 + C2\psi 2$ (C1, C2 - постоянные), описывает состояние, в котором то же измерение даст либо результат 1, либо результат 2...

Эти утверждения составляют содержание так называемого принципа суперпозиции состояний - основного положительного принципа квантовой механики. Из него следует, в частности, что все уравнения, которым удовлетворяют волновые функции, должны быть линейными по ψ...".

1. Bezverkhniy V. D. Structure of the Benzene Molecule on the Basis of the Three-Electron Bond. SSRN Electronic Journal, Nov 2017. P. 28. https://dx.doi.org/10.2139/ssrn.3065241

2. Landau L. D., Lifshits E. M. Theoretical physics in 10 volumes. Volume 3. Quantum mechanics. Fourth edition. Moscow, Nauka, 1989, pp. 20 - 21.